

І. Михайловський, Є. Саданов, Т. Мазілова,  
В. Ксенофонтов, О. Великодна

## ВИСОКОРОЗРІЗНЮВАЛЬНА ПОЛЬОВА ЕЛЕКТРОННА МІКРОСКОПІЯ: СПОСТЕРЕЖЕННЯ АТОМНИХ ОРБІТАЛЕЙ

*Розроблення високопольової методики виготовлення атомних ланцюжків дало можливість досягти в польовому електронному емісійному мікроскопі (ПЕЕМ) ультрависокого розрізнення, яке допомогло авторам пропонованої публікації безпосередньо спостерігати внутріатомну електронну структуру. Застосовуючи криогенний ПЕЕМ, удалося розрізнити просторові конфігурації атомних орбіталей, що відповідають квантовим станам атома на кінці вуглецевих атомних ланцюжків. Отриманий результат демонструє можливість візуалізації основних аспектів квантової механіки і може сприяти появі та розвитку нових підходів у сфері нанотехнологій.*

Минуле сторіччя ознаменувалося двома особливо значущими подіями в історії мікроскопії — отриманням зображення окремих атомів і їх хімічною ідентифікацією [1], — пов'язаними з іменем Ервіна Мюллера. У цих роботах уперше вдалося наочно продемонструвати правильність гіпотези Демокріта про існування атомів як фундаментальних елементів матерії. Сучасні атомістичні уявлення закладені в дослідженнях Дальтона на початку дев'ятнадцятого століття, у яких було встановлено роль

атомів у хімічних реакціях, уведено поняття атомної ваги і складено першу таблицю елементів. Відкриттям у 1912 р. Максом Лауе явища інтерференції рентгенівських променів на кристалах та розробленням методу дослідження структури речовини — рентгеноструктурного аналізу — було остаточно підтверджено періодичну атомну структуру твердих тіл.

Спроби отримати пряме зображення атома робилися протягом першої половини 20-го сторіччя й увінчалися успіхом

© **МИХАЙЛОВСЬКИЙ** Ігор Михайлович. Доктор фізико-математичних наук. Провідний науковий співробітник Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України.  
**САДАНОВ** Євген Вікторович. Науковий співробітник тієї ж установи.  
**МАЗІЛОВА** Тетяна Іванівна. Доктор фізико-математичних наук. Старший науковий співробітник тієї ж установи.  
**КСЕНОФОНТОВ** Вячеслав Олексійович. Кандидат фізико-математичних наук. Завідувач лабораторії тієї ж установи.  
**ВЕЛИКОДНА** Ольга Олександрівна. Кандидат фізико-математичних наук. Старший науковий співробітник тієї ж установи (Харків). 2010.

17 жовтня 1955 р., коли вдалося отримати на атомному рівні зображення поверхні вольфраму в польовому іонному мікроскопі (ПІМ) [1]. Починаючи з роботи Альберта Крю та ін. дослідників [2], у якій за допомогою сканувального просвічувального електронного мікроскопа (ПЕМ) було розрізнено окремі атоми торію, адсорбовані на тонкій вуглецевій плівці, електронні мікроскопи різних типів стають незамінними інструментами дослідження у сфері матеріалознавства, новітніх технологій, медицини та біології. Новий етап у розвитку високорозрізняювальної мікроскопії пов'язаний із розробленням Гердом Біннігом і Генріхом Рорером сканувального тунельного мікроскопа (СТМ) [3]. На сьогодні багато модифікацій сканувальних зондових мікроскопів використовують не тільки для дослідження атомної будови матеріалів, але й для локального аналізу різноманітних фізичних характеристик наноструктурних систем. Нещодавні успіхи техніки корекції аберацій дали змогу збільшити розрізнення просвічувальних електронних мікроскопів до  $0.5 \text{ \AA}$  й забезпечили можливість отримання висококонтрастних зображень атомної структури різних матеріалів [4, 5].

Демокріт не лише передбачив існування неподільних атомів, які створюють у різних з'єднаннях безліч речей у природі, але й вважав, що атоми відрізняються за формою та величиною [6]. Вони, як відомо, складаються з позитивно заряджених ядер і негативно заряджених електронів, які переміщуються навколо ядер зі швидкістю, що становить декілька відсотків від швидкості світла. Згідно з одним із найфундаментальніших положень квантової механіки — принципом невизначеності Гейзенберга, — електрони не можуть рухатися по чітко визначених орбітах. Для опису квантово-механічного стану електронів в атомі Р. Міллікен запровадив поняття «атомної орбіталі», яке відповідає просторовому розподілу вірогід-

ності перебування електрона в певній точці простору  $r$ , яку описують квадратом модуля хвильової функції  $|\Psi(r)|^2$ , що є розв'язком рівняння Шредінгера. «Форму атомів», яку розуміємо як конфігурацію розподілу повної електронної густини, неодноразово визначали методами розсіювання швидких електронів і рентгенівського випромінювання низками атомів кристалічних структур та використанням аналітичних розрахунків в оберненому просторі.

Методи ПЕЕМ [7] і СТМ [8] було з успіхом застосовано для енергетичного аналізу електронних станів окремих атомів. Сканувальна тунельна спектроскопія та польова емісійна електронна мікроскопія забезпечують можливість прямого зондування дискретної електронної структури нанооб'єктів. ПЕЕМ уможлиблює спостереження окремих квантових точок (молекул і атомних кластерів). Органічні молекули в цьому разі формують на люмінесцентному екрані яскраві мультиплети або деякі нерегулярні форми ПЕЕМ-зображень, відомі як «молекулярні зображення» [9-11]. ПІМ, СТМ і ПЕЕМ-зображення окремих атомів мають вигляд відносно широких безструктурних плям, розподіл яскравості в яких може бути апроксимований розподілом Гауса. Це дає підстави розглядати такі зображення радше як детектування окремих атомів, ніж отримання їхніх реальних зображень. Проте слід зауважити, що, використовуючи динамічні СТМ у режимі мінімальних відстаней вістря-зразок, у деяких випадках удалося отримати неізотропні (непараболічні) зображення атомів. У формування цих зображень із «субатомним розрізненням» роблять свій внесок атомні орбіталі на верхівці вістря і на плоскій поверхні зразка [12]. Передбачають, що комбінація методів СТМ і польової іонної мікроскопії, а також проведення детального теоретичного аналізу внеску орбіталей атомів, які беруть участь у тунельному процесі формування СТМ-зо-

бражень, дасть змогу досягти істотного прогресу в їх інтерпретації. Для кожного з мікроскопів високого розрізнення потрібні випробні зразки різної конфігурації. Розрізнення ПЕЕМ істотно залежить від геометрії зразка, що визначає фактор посилення поля над його вершиною. Основний шлях підвищення розрізнення ПЕЕМ – мініатюризація вістрійних зразків [13,14].

Прогрес у виготовленні вуглецевих атомних ланцюжків [15] зробив можливим досягнення екстремально високих факторів посилення поля, яке відповідає субангстремному розрізненню польового іонного мікроскопа [16]. Інтерес до матеріалів на основі вуглецю як елемента, що забезпечує величезне структурне різноманіття, закономірно привів до відкриття фулеренів, нанотрубок, графенів та атомних вуглецевих ланцюжків. З використанням таких об'єктів у майбутніх нанотехнологіях пов'язані великі сподівання. Вуглецеві атомні ланцюжки мають надзвичайно високі стабільність і густину струму руйнування, що зумовлює можливість їх використання в цілісно вуглецевій молекулярній електроніці. В одному з наших досліджень [17] ці наноб'єкти було використано для досягнення максимального розрізнення польового емісійного електронного мікроскопа. Такий прилад розробив Е. Мюллер у 1936 р. в лабораторії нобелівського лауреата Г. Герца. Значний внесок у розроблення методики польової емісійної електронної й іонної мікроскопії та її застосування для розв'язання багатьох проблем фізики поверхонь і матеріалознавства в другій половині минулого сторіччя зробили академіки НАН України А.П. Комар і А.Г. Наумовець [18].

Експерименти проводили в польовому емісійному мікроскопі при 4.2 К в умовах надвисокого вакууму. Окрему пляму зображення на екрані мікроскопа створював пучок електронів, емітованих кінцевим атомом ланцюжка (рис. 1). Контрольоване формування

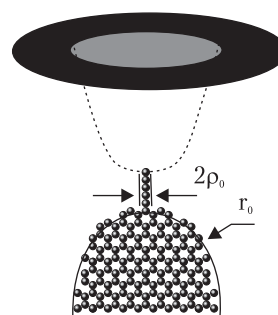


Рис. 1. Схема польового емісійного електронного мікроскопа з лінійним атомним ланцюжком як дослідним зразком.

вуглецевих атомних ланцюжків на мезоскопічних вістрях відбувалося внаслідок розвитку високопольового анравелінгу (трансформації графена в атомний ланцюжок) [15].

Атомні ланцюжки довжиною 3–7 нм було отримано за низьких температур в умовах високого вакууму під дією позитивної електричної напруги 1 – 15 кВ. У процесі такого оброблення напруженість електричного поля була постійною на рівні  $10^{11}$  В/м. ПЕЕМ-експерименти проводили у високовакуумній камері при тиску  $\sim 10^{-7}$  Па. Такі вакуумні умови запобігали потраплянню атомів залишкового газу на досліджувану поверхню. Глибоке охолодження зразка перешкоджало міграції молекул залишкових газів, адсорбованих на поверхні підтримувального вуглецевого вістря. Зміни яскравості зображення в площині екрана відображають кутові варіації щільності польової емісії з верхівки ланцюжка. Для дослідження механізму утворення атомних ланцюжків у сильних електричних полях було проведено математичне моделювання процесу анравелінгу. Сила електричного поля, що викликає осьовий натяг, додавалася до атома на верхівці ланцюжка і під час моделювання становила 0.2–6.0 нН.

Вуглецеві атомні ланцюжки, які закріплено на вуглецевому вістрі, характеризуються високими механічними властивостями і

можуть в атомному масштабі забезпечити гранично великі струми електронної емісії. Струм польової емісії може бути представлено як добуток частоти падіння вільних електронів на поверхневий бар'єр і відповідного коефіцієнта проникнення. У зв'язку з тим, що внесок у польову емісію роблять стани тільки поблизу рівня Фермі, потік тунельованих електронів у ПЕЕМ пропорційний щільності електронних станів [14] і відповідає просторовій конфігурації густини вірогідності, яку описують хвильовою функцією  $|\psi|^2$ . Контраст на ПЕЕМ-зображенні не є абсолютно чітким, тому що електрони, емітовані з деякої точки зразка, мають поперечну швидкість, унаслідок чого відбувається розмиття плями на люмінесцентному екрані. Розрізнення ПЕЕМ може виявлятися в термінах параметра  $\delta$ , що визначаємо як відношення мінімального діаметра плями зображення до збільшення зображення  $M$ . Відомі щонайменше три чинники, які визначають розрізнення ПЕЕМ, а саме: швидкість електрона поблизу рівня Фермі, принцип невизначеності та геометричний коефіцієнт збільшення, залежний від форми вершини зразка. Розрізнення ПЕЕМ-зображень наноб'єктів зі збільшенням  $M > 10^6$  визначається переважно на основі принципу невизначеності [15]. У цьому наближенні розрізнення можна подати як  $\delta = (2\eta\tau/m_e M)^{1/2}$ , де  $m_e$  — маса електрона, а  $\tau$  — час його прольоту від вістря до екрана.

Вуглецевий атомний ланцюжок має металеву провідність і здатний повністю екранувати прикладене електричне поле  $F$ , унаслідок чого над кінцевим атомом зростає напруженість електричного поля. Для визначення розрізнення зображень атомного ланцюжка на вістрійному електроді було використано модель «циліндр на параболоїді» (рис. 1), у якій атомні ланцюжки висотою  $l$ , що мають циліндрову форму, закриті півсферою з радіусом  $\rho_0 = 0.12$  нм і нормальні щодо параболічного електрода з ра-

діусом кривизни  $r_0$ . Вуглецевий атомний ланцюжок — ідеальний провідник з еквіпотенційною поверхнею, завдяки якій силові лінії та початкова частина траєкторії електронів ортогональні до ефективної електронної поверхні. Силові лінії електричного поля, що радіально розходяться, нормальні до поверхні на малій відстані, але в міру віддалення стискаються. Параболічне стиснення силових ліній зменшує фактичне збільшення. Збільшення ПЕЕМ-зображень пропорційне відношенню відстані зразка-екран  $R$  до радіуса вершини  $\rho_0$  зразка:  $M = R/\beta\rho_0$ , де  $\beta$  — коефіцієнт стиснення зображення. Для традиційних ПЕЕМ-зразків у формі параболоїда  $\beta$  становить  $\sim 1.5$ , але для одновимірних ланцюжків на вістрі його значення значно вище [17]. Використовуючи аналітичні співвідношення для коефіцієнтів стиснення  $\beta$  та посилення електричного поля  $\gamma$ , було отримано формулу для визначення мінімального розміру розрізняваних емісійних плям на ПЕЕМ-зображеннях лінійних наноб'єктів:

$$\delta = (2\eta\xi\rho_0)^{1/2} \left[ \frac{em_e}{\gamma} LF \ln(2R/r_0) \right]^{-1/4},$$

де  $\xi$  — чисельна константа, яка майже не залежить від конфігурацій ланцюжків і підтримувального вістря і має значення 1.145,  $e$  — заряд електрона. Напруженість поля  $F$  у ПЕЕМ-дослідженнях вуглецевих атомних ланцюжків варіюється у вузькому інтервалі значень близько  $10^9$  В/м.

Розрізнення визначається на основі принципу невизначеності та коефіцієнта збільшення зображення, залежного передусім від радіуса й довжини ланцюжка чи нанотрубки. На рис. 2 показано залежність розрізнення функції радіуса підтримувального електрода для атомних ланцюжків і нанотрубок. Розрізнення ПЕЕМ насамперед визначається радіусом верхівки  $\rho_0$  і лише потім — розмірами підтримувального електрода  $r_0$ .

Розрізнення для атомних ланцюжків і нанотрубок перевищує стандартне розрізнення польового емісійного електронного мікроскопа. Напруженість поля, збільшення та розрізнення зростають у міру зменшення радіуса циліндрової частини зразка. Застосування в ПЕЕМ таких нанозразків радикально підвищує розрізнення аж до субангстремного рівня, що дає змогу не тільки виявити окремих атомів, а й отримати його детальне зображення.

Для проведення систематичних досліджень конфігурації квадрата хвильової функції в циліндричних координатах  $|\psi(\rho, z, \varphi)|^2$  ми використовували низькотемпературний ПЕЕМ. Більшість отриманих ПЕЕМ-зображень кінцевих атомів вуглецевих ланцюжків мала симетрію, наведену на рис. 3, що відповідає яскравим плямам у формі синглетів і дублетів, а іноді й у вигляді плям довільної форми. Фотографії на рис. 3(а) і (б) було отримано за напруги 425 В і струмів 550 і 150 пА відповідно. Перше польове електронне емісійне зображення кінцевого атома має центральносиметричний розподіл яскравості з максимальною інтенсивністю в центрі, яка властива і для *s*-подібного стану, тоді як на другому зображенні в центрі чітко виявляється вузлова лінія, характерна для *p*-подібного стану.

Важливо, що зникнення або переміщення тільки частини ПЕЕМ-зображень ніколи не реєстрували: синглети та дублети завжди поводитися як єдине ціле. При електронних струмах більше ніж 100 пА синглет міг випадковим чином перебудуватися в дублет і навпаки. Рис. 4 (а) і (б) демонструють характерні зображення двох атомів, один із яких спонтанно змінює вид ПЕЕМ-зображення за постійної напруги.

Ця зміна відповідає *s*→*p* перетворенню електронних орбіталей кінцевого атома. Конфігурація ПЕЕМ-зображення другого атома при цьому залишається незмінною. Стан без вузлової лінії, тобто *s*-подібний стан, дає

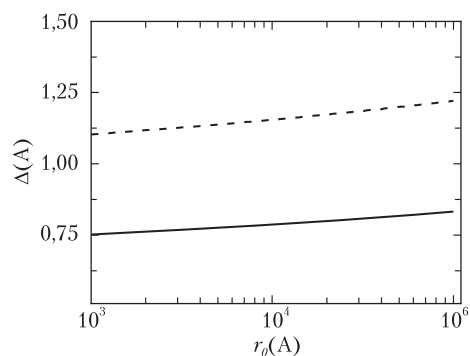


Рис. 2. Залежність теоретичного розрізнення ПЕЕМ від радіуса підтримувального параболічного електрода для вуглецевих атомних ланцюжків і закритих вуглецевих нанотрубок із фулереновою шапочною.

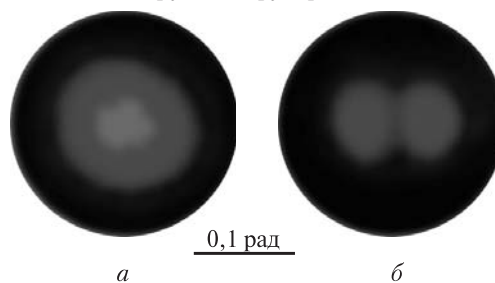


Рис. 3. ПЕЕМ-зображення кінцевих атомів вуглецевих ланцюжків. Синглет (а) і дублет (б), отримані за напруги 425 В.

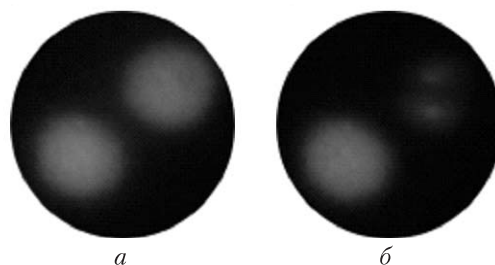


Рис. 4. ПЕЕМ-зображення атомів у вигляді синглетів на кінці двох ланцюжків до (а) і після (б) спонтанного *s*→*p* перетворення одного з атомів за постійної напруги.

більший струм, ніж *p*-подібний стан за однієї й тієї самої напруги. Аналогічний результат для польового емісійного струму для *s*-подібного стану було нещодавно отримано в розрахункових експериментах для надтонкого металевого нанодроту [19].

Яскраві синглети, дублети та змішані зображення органічних молекул було отримано раніше в польовому емісійному мікроскопі [9-11]. До сьогодні більшість із запропонованих механізмів формування таких «молекулярних зображень» спирається щонайменше на два підходи: мономолекулярну [12] і хвилевідну [14, 20-22] моделі. У межах хвилевідної моделі, що пояснює більшість експериментальних результатів, природа молекулярних зображень пов'язана з поширенням електронних хвиль уздовж циліндрового «хвилеводу», сформованого молекулярним комплексом. Згідно з цією моделлю можна пояснити низку експериментальних фактів, проте механізм спонтанних перетворень атомних ПЕЕМ-зображень незрозумілий.

Для порівняння виду квадрата хвильової функції з її розрахунковим значенням ми використовували представлення основного стану лінійних вуглецевих ланцюжків, що демонструють осьову симетрію за допомогою розкладання хвильової функції  $\psi$  у ряд за ортогональною системою функції Бесселя першого роду  $n$ -го порядку, помноженої на хвильову функцію плоскої хвилі, що поширюється в напрямі осі ланцюжка, і на азимутальний фазовий коефіцієнт  $\exp(\pm n\varphi)$  або  $\cos(n\varphi)$  [20]. Радіальна локалізація зумовлює квантовий характер руху електро-

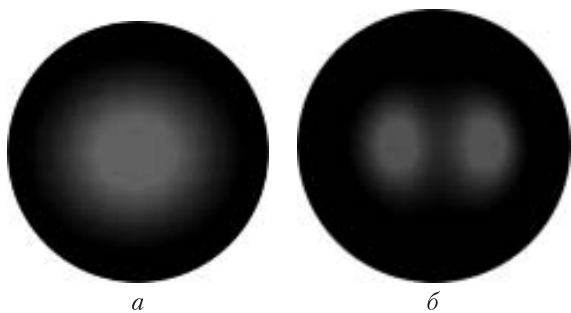


Рис. 5. Просторовий розподіл квадрата хвильової функції ПЕЕМ-зображення атома на кінці вуглецевого ланцюжка, отриманий розрахунковим шляхом для  $s$  – (а) і  $p$  – (б) орбіталей відповідно.

на в напрямку, перпендикулярному до осі ланцюжка. Контраст емісійних картин відповідає квадрату хвильової функції окремих станів із концентричним розподілом яскравості для  $s$ -стану та з явно вираженою вузловою лінією, характерною для  $p$ -стану. Таким чином, можемо якісно пояснити контраст ПЕЕМ-зображень відповідністю  $s$ - і  $p$ -станам. Розподіл локального тунельного струму над нанооб'єктом переважно відображає розподіл густини вірогідності  $|\psi(\rho, z, \varphi)|^2$  в реальному просторі. Порівняння експериментально отриманих ПЕЕМ-зображень (рис. 3 і 4) із теоретичними розрахунками амплітуди електронних хвильових функцій для вуглецевих атомних ланцюжків (рис. 5) показує задовільну відповідність. Підвищення напруженості поля може викликати невелике зростання розміру та яскравості дублетів, але проміжок між будь-якими парами максимумів переважно постійний, і відношення розміру цього проміжку до максимального діаметра плями зображення дорівнює 2.11. Аналітично отримане співвідношення становить 2.081. Близька відповідність розрахованих просторових картин із реальними ПЕЕМ-зображеннями ілюструє, що деякі особливості орбіталей кінцевого атома вуглецевих ланцюжків можуть відтворюватися в межах моделі розподілу густини вірогідності електронів, близької до хвилевідної моделі А.П. Комара і А.А. Комара [20, 21].

Деяке розмиття експериментальних ПЕЕМ-зображень може бути пов'язане з наявністю поперечних моментів емітованих електронів. Для оцінення можливого внеску теплових коливань у розмиття ПЕЕМ-зображень проводили математичне моделювання механічних осциляцій вуглецевого моноатомного ланцюжка, закріпленого на краю графена. Розрахунки виконували за допомогою методу молекулярної динаміки із залученням потенціалу Терсова – Бреннера [23]. Амплітуди теплових коливань вуглецевих

атомних ланцюжків порівняно великі (близько 2 Å) і роблять певний внесок (~0.2 рад) у збільшення кута електронної емісії з вершини. Проте це значення істотно менше від типового повного кута польової емісії ( $2/3 \pi$ ) [14] і незначно впливає на розмиття ПЕЕМ-зображень. Отже, можна зробити висновок, що ПЕЕМ-зображення в цілому демонструють просторовий розподіл електронів атомів лінійних ланцюжків вуглецю. Розроблення високопольової методики виготовлення вуглецевих атомних ланцюжків дало змогу досягти в ПЕЕМ субангстремного розрізнення, яке можна використати для прямого спостереження в реальному просторі двовимірних зображень електронних орбіталей атомів.

Користуючись нагодою, щиро дякуємо О.С. Бакаєві та А.Г. Наумовцю за цінні коментарі й поради.

1. *Tsong T.T.* Fifty Years of seeing atoms // *Physics Today*. — March 2006. — P. 31–37.
2. *Crewe A.V., Wall J.S., Langmore J.P.* Visibility of single atoms // *Science*. — 1970. — Vol. 168. — P. 1338–1340.
3. *Binnig G., Rohrer H.* Scanning tunneling microscopy — from birth to adolescence // *Rev. Mod. Phys.* — 1987. — Vol. 59. — P. 615–625.
4. *Erni R., Rossell M.D., Kisielowski C., Dahmen U.* Atomic-resolution imaging with a sub-50-pm electron probe // *Phys. Rev. Lett.* — 2009. — Vol. 102. — P. 096101 (4 p.).
5. *Girit C.Ö., Meyer J.C., Erni R., Rossell M.D., Kisielowski C., Yang L., Park C.-H., Crommi M.F., Cohen M.L., Louie S. G., Zettl. A.* Graphene at the edge: stability and dynamics // *Science*. — 2009. — Vol. 323. — P. 1705–1708.
6. *Храмов Ю.А.* Физики. — М.: Наука, 1983. — 399 с.
7. *Rokuta E., Kuo H.-S., Itagaki T., Nomura K., Ishikawa T., Cho B.-L., Hwang I.-S., Tsong T.T., and Oshima C.* Field emission spectra of single-atom tips with thermodynamically stable structures // *Surf. Sci.* — 2008. — Vol. 602. — P. 2508–2512.
8. *Crommie M.F., Lutz C.P., Eigler D.M.* Spectroscopy of a single adsorbed atom // *Phys. Rev. B*. — 1993. — Vol. 48. — P. 2851–2854.
9. *Melmed A.J., and Müller E.W.* Study of molecular patterns in the field emission microscope // *J. Chem. Phys.* — 1958. — Vol. 29. — P. 1037–1041.
10. *Condon G.R. and Panitz J.A.* Mapping the field-emission tunneling barrier of organic adsorbates on tungsten // *J. Vac. Sci. Technol. B*. — 2000. — Vol. 18. — P. 1216–1221.
11. *Тумарева Т.А., Соминский Г.Г., Поляков А.С.* Формирование микрообразований с упорядоченной структурой эмиссии в фуллереновых покрытиях полевых эмиттеров // *ЖТФ*. — 2002. — №72. — Вып. 2. — С. 111–115.
12. *Herz M., Giessibl F.J., Manhart J.* Probing the shape of atom in real space // *Phys. Rev. B*. — 2003. — Vol. 68. — P. 045301 (7 p.).
13. *Brodie I.* The visibility of atomic objects in the field electron emission microscope // *Surf. Sci.* — 1978. — Vol. 70. — P. 186–196.
14. *Gomer R.* Field Emission and Field Ionization. — New York: American Inst. of Physics, 1993.
15. *Mikhailovskij I.M., Wanderka N., Ksenofontov V.A., Mazilova T.I., Sadanov E.V., Velicodnaja O.A.* Preparation and characterization of monoatomic C-chains: unraveling and field emission // *Nanotechnology*. — 2007. — Vol. 18. — P. 475705 (6 pp.).
16. *Mazilova T.I., Mikhailovskij I.M., Sadanov E.V., Ksenofontov V.A.* Field-ion microscopy of quantum oscillations of linear carbon atomic chains // *Nanoletters*. — 2009. — Vol. 9. — №2. — P. 774–778.
17. *Mikhailovskij I.M., Sadanov E.V., Mazilova T.I., Ksenofontov V.A., and Velicodnaja O.A.* Imaging the atomic orbitals of carbon atomic chains with field-emission electron microscopy // *Phys. Rev. B*. — 2009. — Vol. 80. — P. 165404 (7pp.).
18. *Наумовец А.Г.* Исследование адсорбционных и эмиссионных явлений в сильных электрических полях: украинская глава // Автоионная и автоэлектронная микроскопия и спектроскопия: история, достижения, современное состояние, перспективы / Под ред. А.Л. Суворова. — М.: Академпринт, 2003. — С. 90–106.
19. *Lee Ch.-K., Lee B., Ihm J., and Han S.* Field emission of metal nanowires studied by first-principles methods // *Nanotechnology*. — 2007. — Vol. 18. — P. 475706.
20. *Комар А.П., Комар А.А.* Молекулы и комплексы молекул и атомов как волноводы электронных волн // *ЖТФ*. — 1961. — Т. 31. — № 2. — С. 231–237.
21. *Комар А.П., Комар А.А.* К теории волновых свойств металлоподобных молекул и их комплексов // *ЖТФ*. — 1962. — Т. 32. — № 7. — С. 867–873.
22. *Комар А.П., Савченко В.П.* «Волноводная» теория автоэлектронной эмиссии молекулярных комплексов полупроводников и результаты эксперимента // *ФТТ*. — 1965. — Т. 7. — № 3. — С. 759–768.
23. *Brenner D.W.* Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films // *Phys. Rev. B*. — 1990. — Vol. 42. — №15. — P. 9458–9471.

*І. Михайловський, Є. Саданов,  
Т. Мазілова, В. Ксенофонов, О. Великодна*

ВИСОКОРОЗРІЗНЮВАЛЬНА ПОЛЬОВА  
ЕЛЕКТРОННА МІКРОСКОПІЯ:  
СПОСТЕРЕЖЕННЯ АТОМНИХ ОРБІТАЛЕЙ

Резюме

Високе розрізнення польового електронного емісійного мікроскопа, яке отримано нещодавно завдяки застосуванню високопольової методики виготовлення атомних ланцюжків, може бути використане для прямого спостереження внутріатомної електронної будови. У криогенному мікроскопі одержано зображення просторових конфігурацій атомних орбіталей, що відповідають квантовим станам атома на кінці вуглецевих атомних ланцюжків. Отриманий результат демонструє можливість візуалізації основних аспектів квантової механіки і може сприяти виникненню та розвитку нових підходів у галузі нанотехнологій.

*Ключові слова:* вуглецеві атомні ланцюжки, внутріатомна електронна будова, графен, криогенний мікроскоп, емітовані електрони.

*I. Mykhailovskiy, Ye. Sadanov,  
T. Mazilova, V. Ksenofontov, O. Velykodna*

HIGH-RESOLUTION FIELD  
ELECTRON MICROSCOPY:  
ATOMIC ORBITALS IMAGING

Summary

A recently developed high-field technique of atomic chains preparation has made it possible to attain the ultrahigh resolution of field-emission electron microscopy, which can be used for direct imaging of the intra-atomic electron structure. Application of cryogenic microscope has allowed to obtain the spatial configuration of atomic orbitals that correspond to quantized states of the end atom in free-standing carbon atomic chains. The obtained result shows the possibility to visualize the major aspects of quantum mechanics and may facilitate creation and development of new approaches in nanotechnology applications.

*Keywords:* carbon atomic chains, intra-atomic electron structure, graphene, cryogenic microscope, emitted electrons.